

Потенциальный мультиферроизм в ромбических фтороперовскитах

Р.М. Дубровин¹, Л.Н. Алябьева², Р.В. Писарев¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, 194021 Санкт-Петербург, Россия

e-mail: dubrovin@mail.ioffe.ru

²Лаборатория терагерцовой спектроскопии, МФТИ, 141701 Долгопрудный, Россия

Представлены результаты экспериментального исследования динамики решетки магнитных кубических и ромбических фтороперовскитов. Показано что в ромбических *Pnma* фтороперовскитах может реализоваться сегнетоэлектрическая неустойчивость геометрической природы, что подтверждает теоретические предсказания.

Перовскиты, в первую очередь оксиды, проявляют поразительное разнообразие физических явлений, таких как сегнетоэлектричество, мультиферроизм, гигантское магнитосопротивление и другие, обладающих широким практическим применением. Одной из причин этого является неустойчивость кубических перовскитов по отношению к структурным искажениям, что приводит к богатой фазовой диаграмме со множеством фазовых переходов. Однако подавляющее большинство перовскитов кристаллизуются в ромбическую неполярную группу *Pnma* и не являются сегнетоэлектриками. При этом, существование сегнетоэлектриков и мультиферроиков среди перовскитов должно рассматриваться как исключение, поскольку требуется сильная гибридизация между анионами O^{2-} и стереохимически активными неподеленными электронными парами катионов Pb^{2+} , Bi^{3+} или сегнетоэлектрически активным ионом Ti^{4+} .

В отличие от перовскитов оксидов, нет ни одного фтороперовскита, являющегося сегнетоэлектриком или мультиферроиком. Тем не менее, недавние расчеты из первых принципов предсказывают возможность реализации сегнетоэлектрической неустойчивости геометрической природы в кубической фазе ромбических *Pnma* фтороперовскитов [1], а также перовскитов оксидов [2], коррелирующей с толеранс-фактором Голдшмидта t . В ромбической фазе данная неустойчивость полностью подавлена смещениями катионов совместно с поворотами октаэдров. Однако в случае ромбических *Pnma* перовскитов с малыми значениями t могут наблюдаться некоторые проявления предсказанной сегнетоэлектрической неустойчивости.

В данной работе мы показываем, что ромбический *Pnma* фтороперовскит $NaMnF_3$ с наименьшим значением $t = 0.78$ является потенциальным мультиферроиком, в котором потенциальное сегнетоэлектричество сосуществует, а также взаимодействует с антиферромагнитной подсистемой [3]. Кроме этого, рассмотрены особенности динамики решетки нескольких магнитных кубических и ромбических фтороперовскитов [4].

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 19-02-00457 и РНФ 19-72-00055.

1. A.C. Garcia-Castro, et al., *Phys. Rev. B* **89**, 104107 (2014).
2. N.A. Benedek, C.J. Fennie, *J. Phys. Chem. C* **117**, 13339 (2013).
3. R.M. Dubrovin, et al., *Phys. Rev. B* **101**, 180403(R) (2020).
4. R.M. Dubrovin, et al., *Phys. Rev. B* **100**, 024429 (2019).